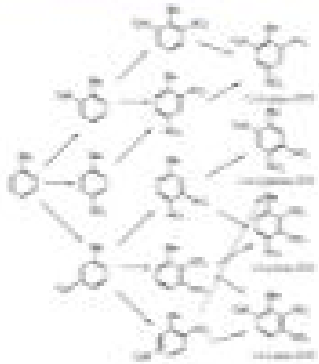
Descripción del Proceso

La meta del proceso es obtener el 2-4-6 alpha TNT, que es el único isómero simétrico y de interés. El proceso consta de sucesivas nitraciones del tolueno, siendo las primeras dos en flujo continuo, y la última en batch.

En este proceso se trabaja con diclorometano como solvente, y se usan como agentes nitrantes el N2O5 y HNO3.

En general la etapa más importante es la primera nitración, ya que se debe obtener la menor cantidad del meta MNT.



Proporciones en TNT crudo: gamma: 2.5%; beta: 1.75%; meta: 0.5%; epsilon: 0.05%; delta: 0.005%.

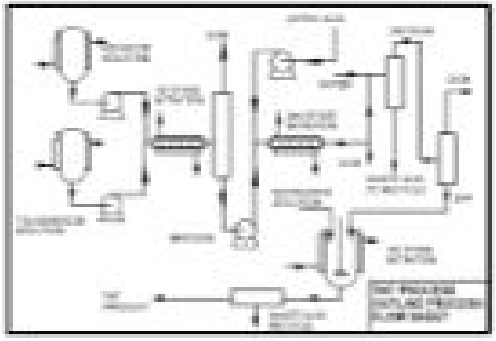
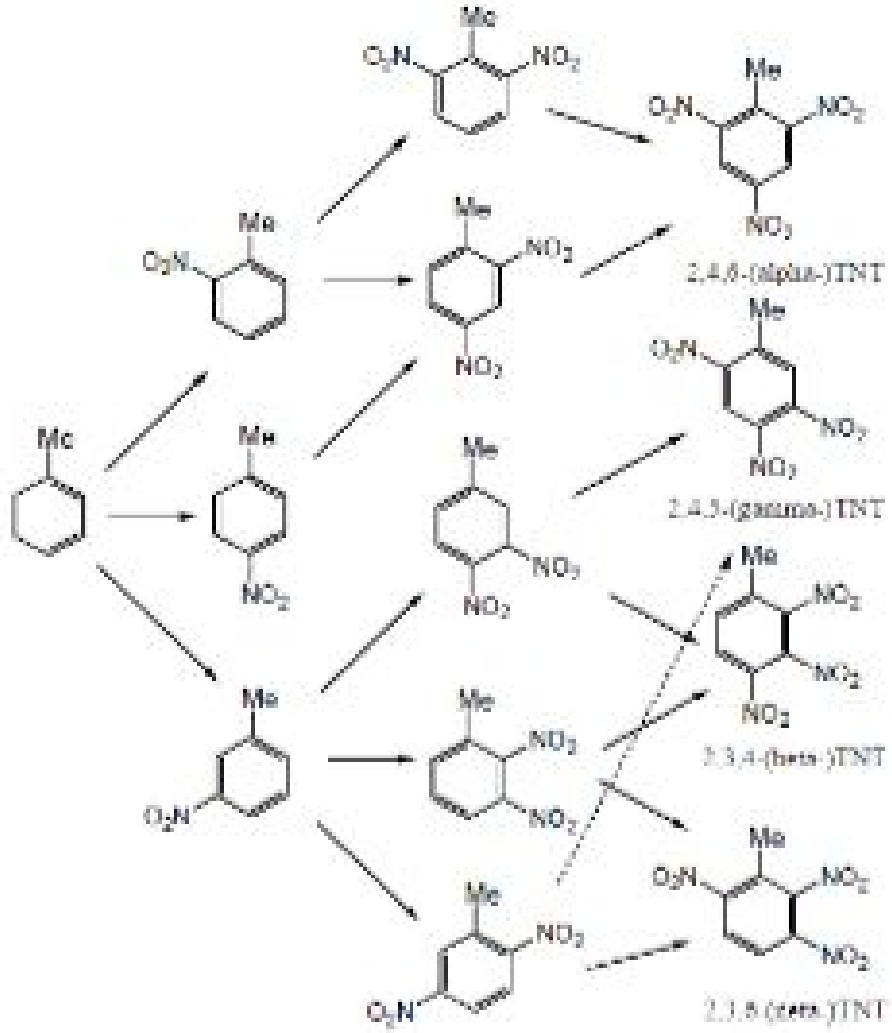


Fig. 3: Esquema de un reactor de nitración de tolueno

La meta del proceso es obtener el 2-4-6 alpha TNT, que es el único isómero simétrico y de interés. El proceso consta de sucesivas nitraciones del tolueno, siendo las primeras dos en flujo continuo, y la última es batch.

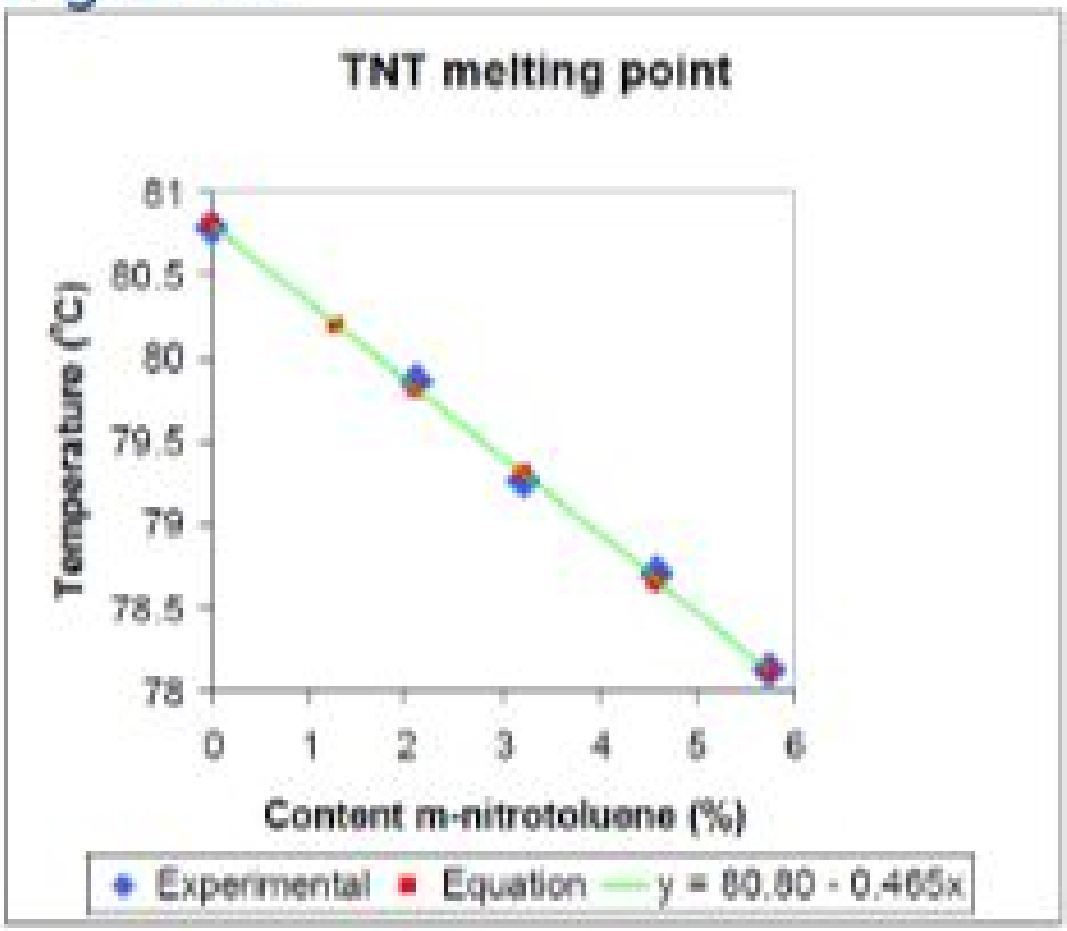
En este proceso se trabaja con dicloro metano como solvente, y se usan como agentes nitrantes el N_2O_5 y HNO_3.

En general la etapa más importante es la primera nitración, ya que se debe obtener la menor cantidad del meta MNT.



Proporciones en TNT crudo:
gamma: 2.5%; beta: 1.75%; neta: 0.5%;
epsilon: 0.05%; delta: 0.006%.

La pureza del TNT se mide por su punto de fusión, que tiene relación directa con el porcentaje de meta MNT residual, como se ve en esta gráfica:



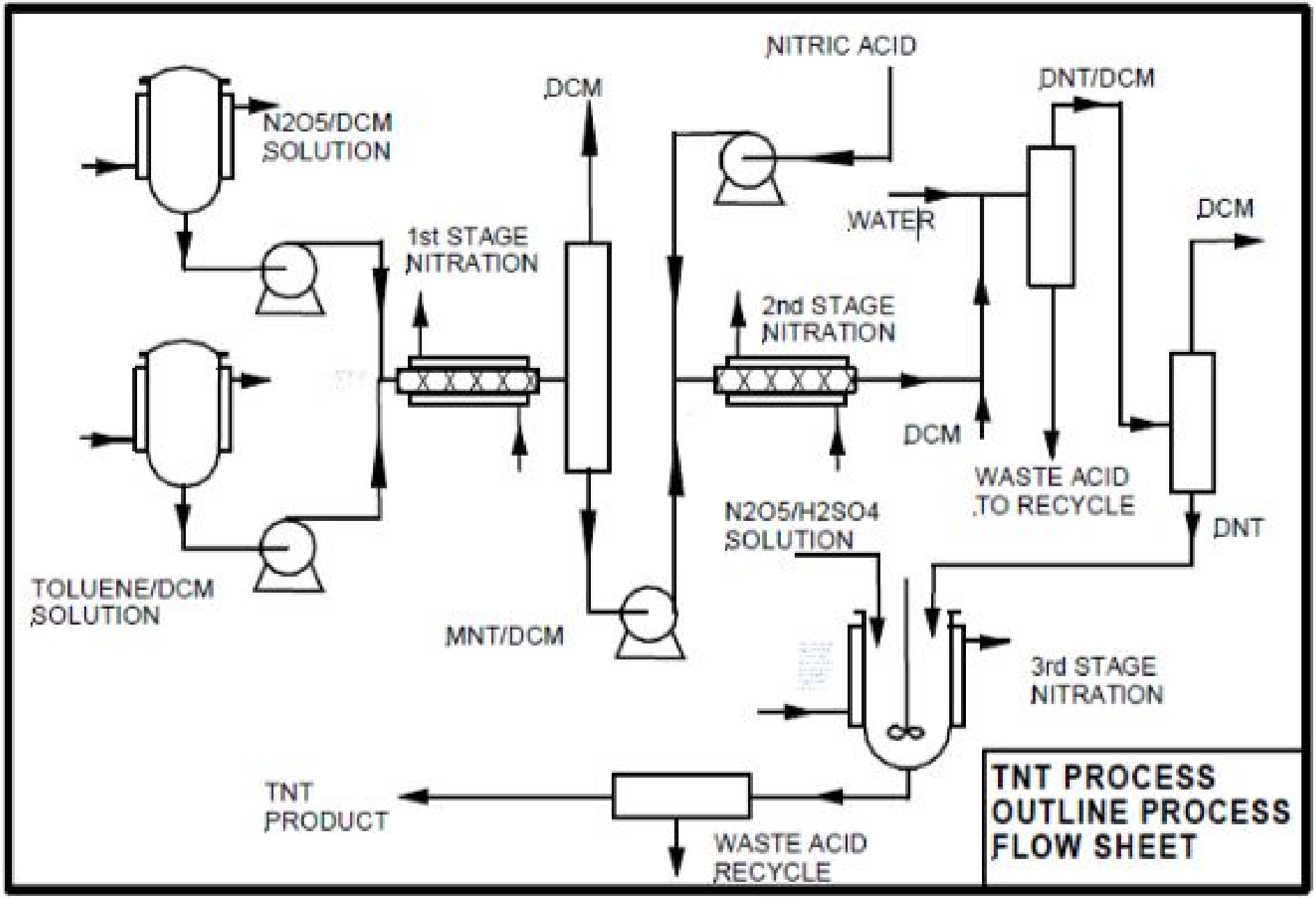


Fig. 18: Schematic for complete nitration process (simplified)

Lo primordial en la primera nitración es controlar la temperatura. La reacción es muy exotérmica y sucede muy rápido (el tiempo de residencia es de 15 segundos), por eso se realiza en un reactor de flujo con camisa refrigerante. De todas formas el tolueno y el N2O5 se refrigeran antes de mezclarse. Una temperatura de -15°C y una relaciòn 1:1 de 5% en peso en la mezcla antes del reactor asegura un porcentaje de metaNT de 1,8%. Si queremos reducir solo un 0,4% esta cantidad tendríamos que trabajar a una T -40°C, lo cual es impracticable en la industria.

En la segunda etapa, se nitra el MNT con HNO_3 puro en exceso. La relación molar HNO_3: MNT debe ser por lo menos 100% la estequiométrica, encontrándose que una relación 6:1 es la óptima. El tiempo de residencia ideal es de 10 minutos para esa relación y una temperatura de reacción de 25°C. A la salida del segundo reactor, la mezcla se lava con agua para separar el ácido, y después se vuelve a evaporar para separar el solvente puro de la mezcla de solvente DNT.

La tercera nitración es batch. Se realiza con ácido sulfúrico concentrado con N_2O_5, en una relación 5:1. La conversión en este reactor es de un 90% y debe permanecer la mezcla en el reactor por 4 horas. El TNT que sale del reactor se lava con agua para separar el ácido, se pasa por una corriente de $NaHCO_3$ para lavar las impurezas, se filtra, se cristaliza y se escama.